



TITLE:

B16 非平衡状態にある流体の計算機実験(配位相転移の研究,基研研究会報告)

AUTHOR(S):

内藤, 豊昭; 小野, 周

CITATION:

内藤, 豊昭 ...[et al]. B16 非平衡状態にある流体の計算機実験(配位相転移の研究,基研研究会報告). 物性研究 1976, 26(2): B119-B123

ISSUE DATE:

1976-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89147>

RIGHT:

参 考 文 献

- 1) M. Takagi: J. Phys. Soc. Japan 9 (1954) 359
 今までの熱力学的理論の簡単なレビューが最近の次の論文の中にある。
 S. J. Peppiatt & J. R. Sambles: Proc. Roy. Soc. A 345 (1975) 387
- 2) A. Guinier: *X ray Diffraction* (Freeman Co. 1963) p.90
- 3) 実験値は次の論文から取った。
 C. R. M. Wronski: Brit. J. Appl. Phys. 18 (1967) 1731

B 16

非平衡状態にある流体の計算機実験

東大教養 内 藤 豊 昭
 小 野 周

剛体球系の粘性係数及びその Shear-rate に対する依存性を、非平衡分子力学により Couette flow を Simulate する事により求めた。粒子数 N は 108, 及び 256 にとり一辺 L の立方体を基準領域にとり, その各辺に平行に x, y, z 軸にとる。局所的な速度の x 成分が z 軸方向に一定な傾き D を持つような系を考える。計算機実験での最も基本的な境界条件としては、平衡状態で用いられている周期的境界条件を定常流が存在する系を取り扱えるように拡張した。基準領域を、それに合同な領域で囲んだ時、基準領域に対して、上側に接する領域では DL , 下側に接する領域では $-DL$ だけ大きい重心速度の x 成分を持つ。従って、基準領域にある速度 (U_i, V_i, W_i) を持つ粒子 i の上側の領域への像 i' の速度、座標として

$$U_{i'} = U_i + DL ; \quad V_{i'} = V_i ; \quad W_{i'} = W_i \quad (1)$$

$$X_{i'} = X_i + DLt ; \quad Y_{i'} = Y_i ; \quad Z_{i'} = Z_i \quad (2)$$

ととる。 i の下側の領域への像 i'' の位置、速度は、(1), (2) で $+$ を $-$ に換えた

ものを与える。更に粒子 i が基準領域から上側，下側に出て行った時には i の位置，速度を i'' 及び i' のもので置き換える。(2)の位置の与え方で，粒子の運動が常に連続で，境界条件が Newton の運動方程式と矛盾しないものになり，従って，同一領域内で起こる衝突と，二つの領域にまたがって起こる衝突に差を無くす事が可能である。

この境界条件を採用する事により，粒子数が少ないという計算機実験の不可避な制約よりの影響を，平衡状態の場合と同程度にする事が出来，やや人為的と思える Gosling, McDonald, Singer¹⁾, 及び Ashurst, Hoover²⁾ の課している境界条件より適切なものと考えられる。

上記の境界条件下では，系の温度は Couette flow でのエントロピー生成により，上昇する。粘性係数はこのエントロピー生成率 $C_V \dot{T} = \eta D^2$ より求める。実際の計算では基準領域を z 軸に垂直な 10 層に分け，各々の層内で局所温度，局所密度を定義し，これらの局所量がほぼ一樣になり，かつ局所速度が目的とする直線にほぼ乗ることを確かめてから粘性係数の計算を始める。この定常状態は，初期条件が，粒子を f.c.c 構造に配置し，粒子の速度は，Random な方向を持ち，ほぼ同じ大きさであるとした時 $N=108$ ， $\rho_r = \rho/\rho_c = 0.354$ (ρ_c は最充填密度)， $DL = 0.1 \times$ (初期条件での速度の root mean square) と取った時，10,000 回の衝突以内で実現された。これを物理的時間に換算すると，剛体球の直径，質量を A_r 原子と同じものにとると 0.4×10^{-10} s になる。一方，速度分布は数千回の衝突以内に近似的な Maxwell 分布となる。

単位系として，剛体球の直径 σ ，質量 M ，及び $\tau = \sigma (M/k_B T_0)$ (T_0 は任意の温度) を長さ，質量，及び時間の単位とする。換算温度 θ ，Reduced Shear-rate Dr を $\theta = T/T_0$ ， $D_r = D\tau/\sqrt{\theta}$ と定義すれば，剛体球系ではポテンシャルにエネルギーパラメーターがない事から温度は本質的な役割を課さず，従って温度変化は，単に時間の進み方を変えるにすぎないから， $\eta(\theta, D, \rho_r) \theta^{-1/2} = \eta_0(D_r, \rho_r)$ は D_r 及び ρ_r のみに依存する。 η_0 の D_r を通しての温度変化を無視して，温度上昇より求めた値を η_0^T とすると， η_0^T は n を粒子数密度として，

$$\sqrt{\theta} = \frac{1}{3} D^2 \eta_0^T t/n + \text{const.}$$

と与えられる。一方，圧力テンソルから求めた η_0 の値を η_0^P と書けば， η_0^P は圧力テンソルの $x-z$ 成分を P^{xz} として，

$$\eta_0^P = - \frac{1}{\sqrt{\theta}} \cdot \frac{1}{D} \cdot P^{xz}$$

から求まる。

我々の計算では、 $\rho_r = 0.1$ から $\rho_r = 0.68$ まで 8 点の密度について、 $D\tau = 1/120$, $1/60$, $1/30$, $1/15$ の shear-rate について上記の η_0^T , η_0^P を計算した。 $\rho_r = 0.667$ が計算機実験で示唆されている固相一流相転移点であるから $\rho_r = 0.68$ は準安定流体相になっている。表 1 に η_0^T , η_0^P の代表的な値を示した。これから、 η_0^T , η_0^P の計算値がよく一致している事、従って、局所的な温度、密度が、この計算の範囲内においては一樣とみなし得る事、更には我々の η_0 の計算精度が良いと思われる事がわかる。

表 1

ρ_r	η_0^T	η_0^P	Range of θ
0.1	0.21 ± 0.01	0.21 ± 0.01	0.65 ~ 4.8
0.2	0.26 ± 0.01	0.25 ± 0.02	0.66 ~ 1.2
0.354	0.52 ± 0.02	0.55 ± 0.04	0.43 ~ 0.96
0.6	2.9 ± 0.2	2.9 ± 0.1	0.53 ~ 1.49
0.667	6.5 ± 0.3	6.6 ± 0.5	0.34 ~ 1.48
0.667 ^(a)	7.9 ± 0.3	7.6 ± 1.6	0.36 ~ 0.92
0.667 ^(b)	8.7 ± 0.2	8.6 ± 0.4	0.36 ~ 0.55

分子力学より得られた

$$\eta_0(D_r, \rho_r) = \eta(T, \sigma D \sqrt{\frac{M}{k_B T}}, \rho_r) / \frac{\sqrt{M k_B T}}{\sigma^2}$$

の値。 $D\tau$ の値は (a) の場合 $1/30$, (b) で $1/60$, 他のものはすべて $1/15$ 。粒子数はすべての場合 108 個。計算の長さは衝突回数で 70,000 ~ 260,000 回。

η_0 の shear-rate による変化は $\rho_r = 0.354$, $\rho_r = 0.667$ の 2 点で調べた。図 1 より $D_r \approx 0$ による η_0 の最初の補正項は Kawasaki-Guntton³⁾ で示されているように $\sqrt{D_r}$ に比例する事がわかる。 $\rho_r = 0.2$, $\rho_r = 0.6$ で各々二つの D_r の値について計算した η_0 の値を用いて $\sqrt{D_r}$ の係数を調べ、 $\eta_0(D_r, \rho_r)$ は近似的に、

$$\eta_0(D_r, \rho_r) = \eta_0(0, \rho_r) [1 - (0.14 + 0.11y) \sqrt{D_r}]$$

と与えられる事がわかった。

ここで $y = PV/Nk_B T - 1$ は compressibility factor で、Carnahan-Starling⁴⁾ の現象論的表示により求めた。

図 2 に上式で外挿した $n(T, 0, \rho_r)$ の値を Enskog の値⁵⁾で規格化して示した。又比較のため、Alder, Gass, Wainwright⁶⁾ の平衡状態の相関関数の積分より求めた値も示してある。

図 2 より、我々の結果は $\rho_r = 0.5$ 位までは Alder 達の値とよく一致しているが、それ以上の密度では、系統的に大きくなる事が認められる。

この相違が出た理由の一つとしては、高密度領域では相関関数の long-tail⁷⁾ は非常に強いものとなっていることから、Alder 達の計算においては、相関関数の漸近的振舞いが充分とり入れられていなかった事も考えられる。

追記：以上の結果は、研究会のときの話を中心にまとめたものであるが、その後を得られた結果を加えた。

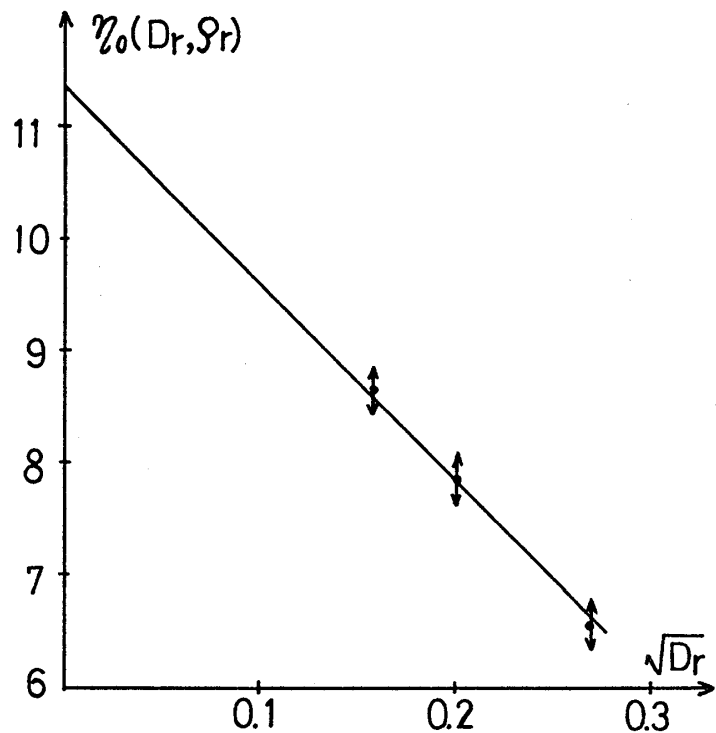


図 1. $\rho_r = 0.667$ の場合に、 $\eta_0(D_r, \rho_r)$ を $\sqrt{D_r}$ に対して外挿したもの。

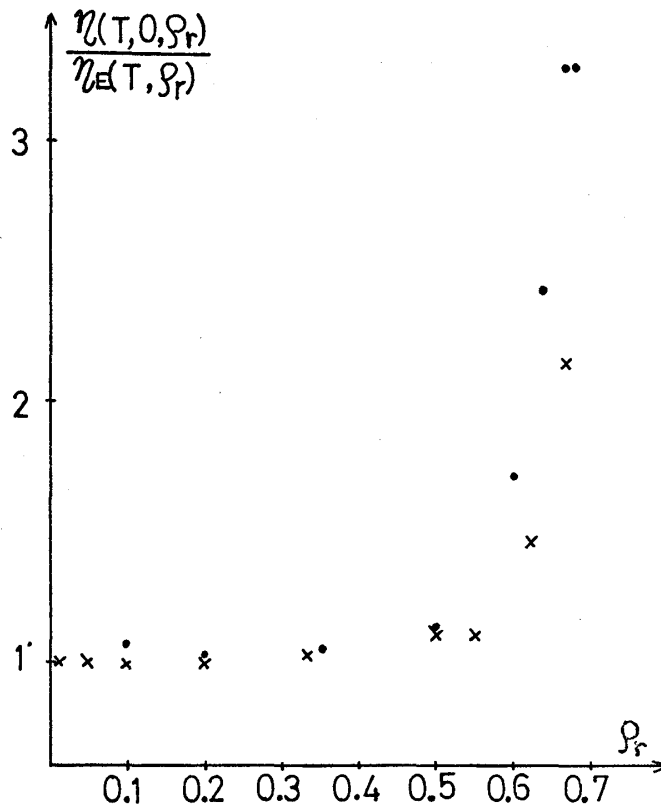


図 2. Reduced density ρ_r の関数として, $\eta(T, 0, \rho_r)$ を Enskog の値 $\eta_E(T, \rho_r)$ で規格化して表わしたもの。「●」は我々の得た結果で, 「x」は Alder 達の得た結果である。

参 考 文 献

- 1) E. M. Gosling, I. R. McDonald and K. Singer, Mol. Phys. 26 (1973) 1475.
- 2) W. T. Ashurst and W. G. Hoover, Phys. Rev. A11 (1975) 658.
- 3) K. Kawasaki and J. Gunton, Phys. Rev. A8 (1973) 2048.
- 4) M. F. Carnahan and K. E. Starling, J. Chem. Phys. 51 (1969) 635.
- 5) S. Chapman and T. G. Cowling, "The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases. Third Edition", (Cambridge U. P., London 1970).
- 6) B. J. Alder, D. M. Gass and T. E. Wainwright, J. Chem. Phys. 53 (1970) 3813.
- 7) Y. Pomeau and P. Reisbois, Phys. Rep. 19C (1975) 63.